

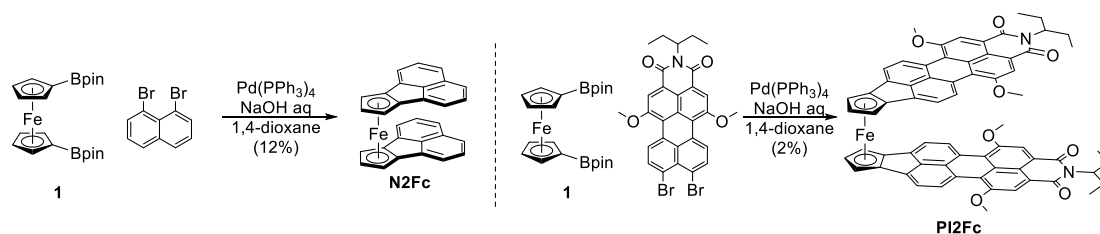
π拡張フェロセンの合成と物性

(奈良先端大先端科技¹) ○森本 裕詞¹・松尾 恭平¹・山田 容子¹・荒谷 直樹¹
 Synthesis and Photophysical Properties of π-Expanded Ferrocenes (¹*Division of Materials Science, Nara Institute of Science and Technology*) ○Hirofumi Morimoto,¹ Kyohei Matsuo,¹ Hiroko Yamada,¹ Naoki Aratani¹

Suzuki-Miyaura cross-coupling reaction of 1,1'-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)ferrocene with 1,8-dibromonaphthalene or 9,10-dibromo-1,6-dimethoxyperyleneimide gave π-expanded ferrocenes. In the structure revealed by single crystal X-ray structural analysis, the two π planes in the crystal are almost overlapping despite the repulsion between the π-electrons. We report the photophysical and electrochemical properties of these compounds.

Keywords: Ferrocene; π-Conjugation; Cross coupling.

優れたレドックス活性をもつフェロセンの機能をデザインする目的で、上下のシクロペンタジエニル(Cp)環のπ拡張を試みた。通常はπ拡張したシクロペンタジエン環から鉄錯体化する合成ルートがとられるが、今回我々はビスホウ素化フェロセン(**1**)から鈴木-宮浦クロスカップリングの条件で反応することで上下の Cp 環に直接一段階でナフタレン及びペリレンイミドを縮環することに成功し、新規π拡張フェロセン **N2Fc** 及び **PI2Fc** を得た(Scheme 1)。単結晶 X 線構造解析により、単結晶中では **N2Fc** 及び **PI2Fc** は 2 平面間の反発や、立体障害があるのにも関わらず、ほぼ重なった構造をしていることを確認した(Figure 1)。これらの化合物の光物性や電気化学測定の結果についても報告する。



Scheme 1. Synthesis of π-expanded ferrocenes.

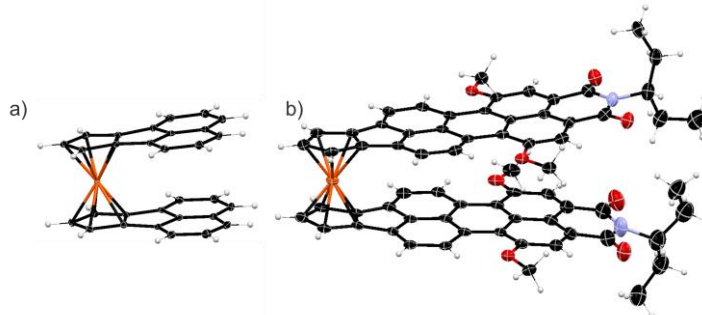


Figure 1. Single crystal X-ray structures of a) **N2Fc** and b) **PI2Fc**